


ШЕПЕЛЕВ ДЕНИС СЕРГЕЕВИЧ

**ЭНЕРГООБМЕН И ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭНЕРГИИ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ**

02.00.06 – высокомолекулярные соединения

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук



Москва, 2012

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки  
Институте химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

*Научный руководитель:*

доктор технических наук, профессор  
Маневич Леонид Исаакович

*Официальные оппоненты:*

доктор физико-математических наук, профессор  
Турусов Роберт Алексеевич

кандидат физико-математических наук,  
Лесничая Валентина Алексеевна

*Ведущая организация:*

Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки Институт проблем механики  
им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Защита диссертации состоится 31» января 2013 г. в 12<sup>30</sup> часов на заседании  
диссертационного совета Д 002.012.01 при Институте химической физики им. Н.Н.  
Семенова РАН по адресу: 119991 Москва, ул. Косыгина, д.4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института химической физики им.  
Н.Н. Семенова РАН.

Автореферат разослан 26» декабря 2012 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 002.012.01  
кандидат химических наук

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КФУ



0000809717

Ладыгина Т.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Углеродные нанотрубки (УНТ) являются в настоящее время одними из наиболее перспективных частиц, используемых в качестве наполнителя полимерных композитов. Они обладают высокой удельной поверхностью, электропроводностью, а также уникальными жесткостными и прочностными характеристиками. В связи с этим задача всестороннего исследования физико-механических свойств УНТ приобретает первостепенное значение. Поведение УНТ, а, следовательно, и композитов с наполнителем такого типа при интенсивных механических и тепловых воздействиях в значительной мере определяется их динамическими свойствами. К ним относятся, прежде всего, частотные спектры и нормальные моды колебаний, которые активно изучались в последние годы как теоретически, так и экспериментально. Однако, нестационарные процессы в УНТ, механизмы энергообмена и переноса энергии, определяющие их теплопроводность и реакцию на интенсивные динамические воздействия, практически не изучены. Поэтому актуальной является тема диссертации, в которой анализ этих механизмов занимает центральное место.

**Цель работы** – разработка применительно к УНТ нового метода анализа нелинейных нестационарных процессов, основанного на концепции *эффективных частиц* и *предельных фазовых траекторий*, с использованием редуцированной модели упругой оболочки, адекватно описывающей динамическое поведение УНТ в низкочастотной области.

**Основные результаты работы, которые выносятся на защиту:**

- 1) Построение нелинейной динамической модели УНТ, которая позволяет аналитически изучать низкоэнергетические процессы при основных типах краевых условий.
- 2) Аналитическое и численное описание интенсивного энергообмена в УНТ и вывод условия, определяющего переход от энергообмена к пространственной локализации энергии.
- 3) Аналитический вывод спектральных характеристик УНТ при основных типах граничных условий.
- 4) Подтверждение универсального характера концепции *эффективных частиц* (ЭЧ) и *предельных фазовых траекторий* (ПФТ), использующей аппарат негладких функций, при анализе нестационарных процессов в последовательно усложняемых динамических моделях: от нелинейного осциллятора до УНТ.

**Научная новизна.** Впервые выполнено исследование низкоэнергетической нелинейной динамики УНТ, что потребовало разработки концепции ЭЧ и ПФТ

применительно к ряду моделей с последовательно усложняемой структурой. Если при использовании известных моделей новым является анализ нестационарных процессов в рамках концепции ЭЧ и ПФТ, то наиболее реалистичная модель УНТ впервые представлена в диссертации. С ее использованием впервые описаны, наряду со спектральными характеристиками при основных типах краевых условий, существенно нелинейные процессы энергообмена и локализации энергии в УНТ.

**Практическая значимость работы.** Полученные результаты создают основу для уточненного анализа механизма теплопроводности УНТ. Кроме того, они позволяют адекватно описать реакцию УНТ на интенсивные динамические воздействия и должны быть учтены при оценке термомеханических характеристик полимерных нанокомпозитов, в которых УНТ являются наполнителем.

**Личный вклад автора.** Автор, выполняя работу в лаборатории физики и механики отдела полимеров ИХФ РАН, активно участвовал (совместно с Л. И. Маневичем и В. В. Смирновым) в разработке новой концепции ЭЧ и ПФТ, которая предполагает использование негладких преобразований - основного математического аппарата, примененного в диссертации. Это же относится к разработке новых динамических моделей УНТ, в рамках которых получены основные результаты диссертации. Автором лично выполнена как аналитическая часть работы, так и соответствующее численное исследование. Он принимал активное участие в постановке задач исследования, обсуждении результатов и подготовке публикаций.

**Апробация работы.** Основные результаты работы были представлены на международных конференциях «Современные проблемы механики» (Санкт-Петербург, 2009, 2010, 2011 гг.), Европейской конференци по нелинейным колебаниям (Рим, Италия, 2011 г.), на конференциях отдела полимеров и композиционных материалов ИХФ РАН (Москва, 2009, 2010, 2011, 2012 гг.). Доклады по материалам работы отмечались премиями на конкурсах молодых ученых.

**Публикации.** По результатам диссертационной работы опубликовано 8 статей и 5 тезисов докладов.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация изложена на 177 страницах, включает 77 рисунков и 5 таблиц. Работа состоит из Введения, 6 глав, Выводов, Приложения и списка цитируемой литературы, включающего 113 ссылок.

## **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.**

**Во Введении** обоснована актуальность работы и сформулированы цель, задачи исследования, научная новизна и практическая значимость работы.

В главе 1 приведен обзор литературных данных по экспериментальным исследованиям спектров одностенных и многостенных углеродных нанотрубок различными модификациями метода Рамановской спектроскопии, кратко обсуждаются механизмы, ответственные за D и G'-полосы. Приведен также обзор акустических свойств одностенных УНТ и методов экспериментального измерения модуля Юнга. Особое внимание уделено применению методов молекулярно-динамического моделирования и конечно-элементного анализа, а также различных континуальных теорий, в частности, различных вариантов теории тонких оболочек, к анализу динамики УНТ. Анализ полученных результатов показывает, что, несмотря на активные исследования и наличие богатого инструментария для изучения динамики оболочек, существуют области спектра, в которых имеющиеся упрощенные варианты не работают, в то время как общие теории чрезвычайно сложны в применении. Ввиду сложившейся ситуации была поставлена задача построения новой упрощенной модели тонкой оболочки, применимой в низкочастотной области спектра.

В главе 2 введены физические понятия и математический аппарат, соответствующие концепции ЭЧ и ПФТ, на простой модели нелинейного осциллятора во внешнем поле, причем основное внимание уделяется нестационарной динамике, аналитическое описание которой стало возможным лишь в рамках этих концепций, разработанных сравнительно недавно. Анализ этой модели имеет и самостоятельное значение, поскольку он тесно связан с проблемой целенаправленного переноса энергии от мишени (линейный осциллятор), достигаемого при помощи *энергетической ловушки* резонансного типа (нелинейный осциллятор).

Модель может быть описана следующим уравнением (в безразмерной форме):

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 2\gamma\epsilon \frac{du}{dt} + u + 8\alpha\epsilon u^3 = 2\epsilon F \sin(1 + s\epsilon t) \quad (2.1)$$

с начальными условиями  $u(0) = \frac{du(0)}{dt} = 0$ , где  $u$  - смещение ловушки относительно мишени,  $\gamma$  -- коэффициент диссипации ловушки,  $\alpha$  - параметр нелинейности осциллятора-ловушки,  $F$  - детерминированная или случайная амплитуда воздействия мишени на ловушку,  $s$  - параметр, характеризующий отклонение частоты мишени от частоты ловушки в линейном приближении,  $\epsilon$  - малый параметр, определяющий возможность введения *медленного времени*.

Переходя к комплексным переменным и проводя многомасштабное разложение, можно свести уравнение (2.1) к системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{da}{d\tau_1} + \gamma a = F \cos \Delta \\ a \frac{d\Delta}{d\tau_1} + sa - 3\alpha a^3 = -F \sin \Delta \end{cases}, \quad (2.2)$$

где  $a$  - величина, характеризующая амплитуду и скорость колебаний,  $\Delta$  - фазовый сдвиг ловушки относительно осциллятора,  $\tau_1$  - медленное время, возникающее в процессе многомасштабного разложения. На основе этой системы вводится понятие предельной фазовой траектории - траектории на фазовой плоскости  $a - \Delta$ , соответствующей максимально эффективной перекачке энергии в ловушку.

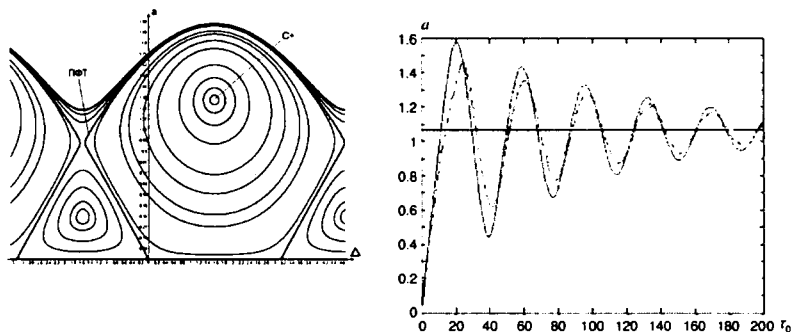


Рис. 1 – фазовая плоскость уравнений (2.2) и аналитическое решение диссипативной системы (2.2), полученное сопряжением решений недиссипативной системы и квазилинейных затухающих к стационарной точке колебаний (сплошная линия – численное решение).

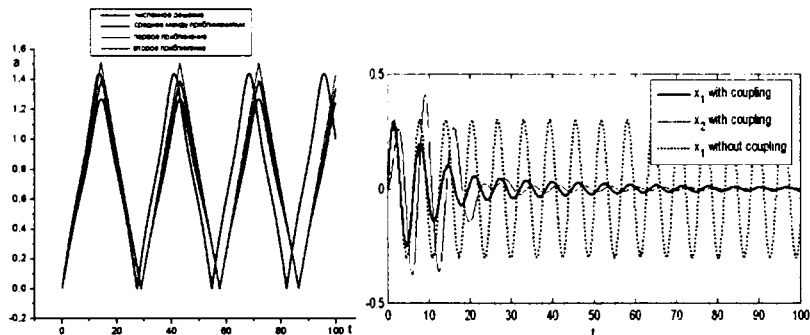


Рис. 2 – аналитическое решение уравнений (2.2) методом негладких преобразований при  $\gamma = 0$  и оценка эффективности энергетической ловушки.

В работе приведены аналитические решения системы (2.2) вдоль ПФТ (как консервативной ( $\gamma = 0$ ), так и диссипативной (см. рис. 2) систем), а также рассмотрено влияние внешнего воздействия, имеющего случайный характер.

В Главе 3 проясняется механизм локализации энергии в  $\alpha - \beta$  цепочке Ферми-Паста-Улама (ФПУ), которую можно рассматривать как модель молекулы олигомера. Здесь концепции ЭЧ и ПФТ распространяются на многомерные системы в наиболее простой ситуации.

Динамика периодической цепочки ФПУ с асимметричным потенциалом взаимодействия между атомами определяется функцией Гамильтона:

$$H_0 = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{2} p_j^2 + \frac{1}{2} (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{\alpha}{3} (q_{j+1} - q_j)^3 + \frac{\beta}{4} (q_{j+1} - q_j)^4 \right], \quad (3.1)$$

и условиями периодичности  $q_{N+1} = q_1, p_{N+1} = p_1$ , где  $q_j$  и  $p_j$  - координаты и, соответственно, сопряженные им моменты,  $N$  - число частиц в системе. Для анализа динамики цепочки выполняется переход к нормальным координатам, задаваемый каноническим линейным преобразованием:

$$q_j = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \sin\left(\frac{2\pi k j}{N}\right) + \cos\left(\frac{2\pi k j}{N}\right) \right) \xi_k, \quad (3.2)$$

Вводя комплексные амплитуды, характеризующие модальные координаты и скорости, и применяя метод многомасштабных разложений, можно свести анализ системы с функцией Гамильтона (3.1) к системе уравнений в угловых переменных:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{d\tau_2} + \left( \frac{\pi^2}{4} - \frac{3\beta_1 X}{16} \right) \Omega^2 \sin \Delta + \frac{3\beta_1 X}{32} \Omega^2 \sin 2\theta \sin 2\Delta = 0, \\ \sin 2\theta \frac{d\Delta}{d\tau_2} + \left( \frac{\pi^2}{2} - \frac{3\beta_1 X}{8} \right) \Omega^2 \cos \Delta \cos 2\theta + \frac{3\beta_1 X}{16} \Omega^2 \sin 4\theta (\cos^2 \Delta - 8) = 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

где  $\beta_1 = \beta - \frac{4}{3}\alpha^2$ ,  $\Delta$  - переменная, характеризующая фазовый сдвиг половины цепочки, образующей ЭЧ, относительно второй ЭЧ,  $\theta$  - переменная, характеризующая амплитуду возбуждения половины цепочки,  $\Omega = 2$  - частота ограничивающая первую зону Бриллюэна,  $X$  - уровень энергии в системе.

Фазовая плоскость системы при различных уровнях возбуждения  $X$  и соответствующие распределения энергии по цепочке во времени представлены на рис. 3.

Точки на фазовой плоскости соответствуют стационарным колебаниям – нормальным модам; траектория, проходящая через уровни  $\theta = 0$  и  $\theta = \frac{\pi}{2}$ , – предельная фазовая траектория, описывающая полный энергообмен между ЭЧ.

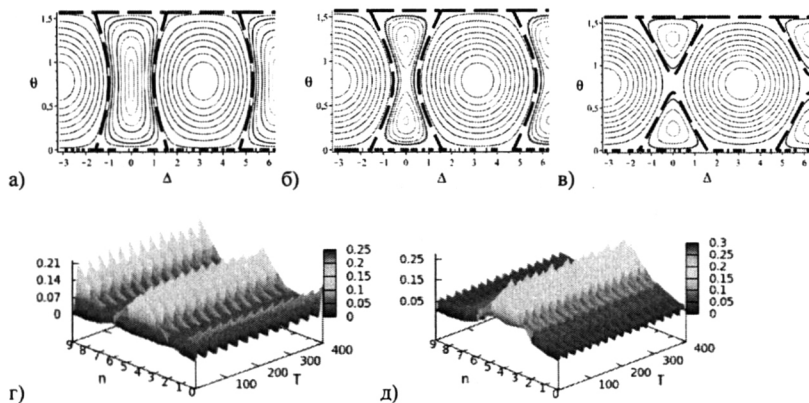


Рис. 3 – фазовая плоскость уравнений (3.3) (а-в); распределение энергии по цепочке во времени: г) при уровне возбуждения, соответствующем фазовой плоскости (б), д) при уровне возбуждения, соответствующем фазовой плоскости (в),

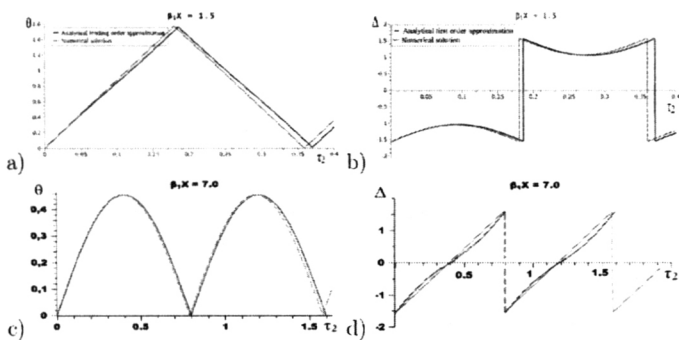


Рис. 4 – аналитическое решение уравнений (3.3), полученное методом негладких преобразований (а-б) – в случае, когда происходит полный энергообмен, (с-д) – локализация энергии на *эффективной частице* (сплошная линия – численное решение).



Как видно по рис. 4, полученное аналитическое решение хорошо согласуется с численным как при полном энергообмене, так и в случае локализации энергии.

**Глава 4** посвящена исследованию простой модели нанотрубки, построенной на базе цепочки типа Клейна-Гордона с изгибным потенциалом.

Рассматривается одностенная УНТ конечной длины со свободно опертыми краями, которая мысленно рассекается на  $N$  колец плоскостями, перпендикулярными ее оси.

В этом случае потенциальная энергия УНТ может быть представлена в виде:

$$\sum_{n=1}^N U_n + V_n, \quad U_n = \int_0^{2\pi} \left[ \frac{1}{2} ESR \varepsilon^2 + \frac{1}{2} EJ R \kappa^2 \right] d\theta, \quad V_n = \int_0^{2\pi} \left[ \frac{1}{2} E\varepsilon_n^2 + \frac{1}{2} EJ' R \kappa_n^2 \right] d\theta, \quad (4.1)$$

где  $\varepsilon$  – деформация контурной длины,  $\varepsilon_{||}$  – продольная деформация (вдоль оси трубки),  $\kappa$  – изгибная деформация формы (изменение кривизны),  $\kappa_{||}$  – изгибная деформация вдоль оси трубки,  $E, J, J'$  – модуль Юнга, момент инерции кольца и момент инерции в плоскости, проходящей через ось трубки,  $S = Rh$  – эффективная площадь элемента сечения кольца.

Деформация УНТ представляется комбинацией низшей по частоте моды эллиптического профиля в плоскости, перпендикулярной оси УНТ ( $\sim X \cos 2\Theta$ ) и двух соседних мод вдоль трубки – в случае свободного опирания это моды с волновыми векторами  $k_z = \frac{\pi}{N}$  и  $k_z = \frac{2\pi}{N}$ . Таким образом, деформация каждого кольца УНТ характеризуется одной переменной – амплитудой эллиптической деформации  $X$ :

$$w_n = X_n \cos 2\Theta, \quad v_n = \frac{1}{2X_n} \sin 2\Theta$$

После интегрирования по углу  $\Theta$  получается следующее представление для энергии деформации

$$U_{\text{де}} = \sum_{n=1}^N \left[ \frac{1}{2} \omega_0^2 \kappa_n^2 + \beta \kappa_n^4 + \frac{1}{2} c^2 \kappa_{||n}^2 \right], \quad \kappa_n = \frac{X_n}{R}, \quad \kappa_{||n} = \frac{X_{n+1} - 2X_n + X_{n-1}}{R}, \quad (4.2)$$

где  $\kappa_n$  и  $\kappa_{||n}$  – соответствующие деформации для  $n$ -го кольца.

Энергия (4.2) содержит также ангармоническую составляющую, которая соответствует учету физической нелинейности.

Перейдя к нормальным координатам, а затем к комплексным амплитудам и проведя многомасштабное разложение, приходим к уравнениям в угловых переменных:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{d\tau_2} + \frac{\delta}{2} \sin \Delta + \frac{3\beta X}{32\omega_1^3} \sin 2\theta \sin 2\Delta = 0, \\ \sin 2\theta \frac{d\Delta}{d\tau_2} + \delta \cos \Delta \cos 2\theta + \frac{3\beta X}{16\omega_1^3} \sin 4\theta (4 - \cos^2 \Delta) = 0, \end{cases} \quad (4.3)$$

где  $\delta$  - параметр, характеризующий разницу частот,  $\Delta$  - переменная, характеризующая фазовый сдвиг первой ЭЧ (одной половины цепочки) относительно второй ЭЧ (соответственно, другой половины цепочки),  $\theta$  - переменная, характеризующая амплитуду возбуждения половины цепочки,  $\omega_1$  - частота первой моды шарнирно опертой цепочки,  $X$  - уровень энергии в системе. Фазовая плоскость системы при различных уровнях возбуждения  $X$  и соответствующие распределения энергии по цепочке во времени представлены на рис. 5.

Точки на фазовой плоскости соответствуют стационарным колебаниям – нормальным модам; траектория, проходящая через уровни  $\theta = 0$  и  $\theta = \frac{\pi}{2}$ , - предельная фазовая траектория, описывающая полный энергообмен между ЭЧ.

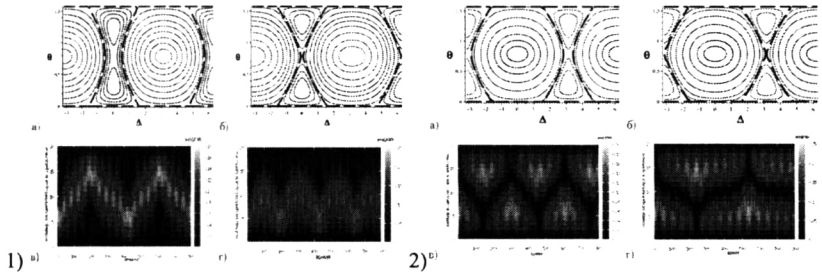


Рис. 5 – фазовые плоскости и энергетические карты цепочки при различных типах нелинейности и уровнях возбуждения: 1) мягкая нелинейность ( $\beta < 0$ ); а), в) биения между эффективными частицами (фазовая плоскость и карта распределения энергии со временем); б), г) переход к локализации (фазовая плоскость и карта распределения энергии со временем); 2) жесткая нелинейность ( $\beta > 0$ ); а), в) биения между эффективными частицами (фазовая плоскость и карта распределения энергии со временем); б), г) переход к локализации (фазовая плоскость и карта распределения энергии со временем);

Как видно по рис. 6, полученное аналитическое решение хорошо согласуется с численным.

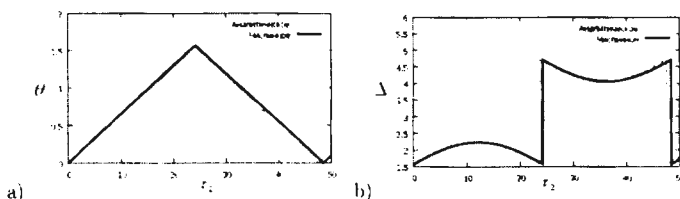


Рис. 6 – аналитическое решение уравнений (4.3) методом негладких функций (толстая линия – численное решение).

Глава 5 посвящена построению модели нанотрубки на основе теории тонких оболочек Сандерса-Коитера.

Деформации и кривизны оболочки записываются, исходя из изменения метрики и второй квадратичной формы:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \left( \alpha \frac{\partial w}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{8} \left( \alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \frac{\partial u}{\partial \theta} \right)^2 & \kappa_1 &= -\alpha^2 \frac{\partial^2 w}{\partial \xi^2} \\ \epsilon_2 &= w + \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w}{\partial \theta} - v \right)^2 + \frac{1}{8} \left( \alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \frac{\partial u}{\partial \theta} \right)^2 & \kappa_2 &= \frac{\partial}{\partial \theta} \left( v - \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \\ \epsilon_{12} &= \frac{\partial u}{\partial \theta} - \alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} & \kappa_{12} &= \left( -2\alpha \frac{\partial^2 w}{\partial \theta \partial \xi} - \frac{3\alpha}{2} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (5.1)$$

где  $\xi = \frac{x}{L}$  – безразмерная координата вдоль оси трубки,  $L$  – длина УНТ,  $\theta$  – угловая координата в поперечном сечении УНТ. Безразмерные продольное  $u$ , радиальное  $w$  и тангенциальное  $v$  смещения измеряются в единицах радиуса УНТ  $R$ , параметр  $\alpha = \frac{R}{L}$  характеризует отношение поперечного и продольного размеров трубки. В уравнениях (5.1) введены безразмерные кривизны, получаемые из размерных величин умножением на радиус. В главе 5 используются линейные составляющие выражений деформаций и кривизн.

Первая задача состоит в получении уравнения для  $w$ , основанного на гипотезах относительной малости кольцевой деформации и деформации сдвига.

После варьирования соответствующей функции Лагранжа и представления смещений в виде

$$\begin{aligned} u(\xi, \theta) &= U(\xi) \cos n\theta \exp(i\omega t), \\ v(\xi, \theta) &= V(\xi) \sin n\theta \exp(i\omega t), \\ w(\xi, \theta) &= W(\xi) \cos n\theta \exp(i\omega t), \end{aligned}$$

последовательного исключения из уравнений тангенциального движения кольцевого и сдвигового усилий и их подстановки в уравнение радиального движения (при этом учитываются выражения продольного и тангенциального смещений через радиальное, полученные из условий относительной малости кольцевой деформации и деформации сдвига), приходим к дифференциальному уравнению 4-го порядка относительно приведенного радиального смещения:

$$\left( \frac{\beta^2 n^2 (n^2 - 1)^2}{12(n^2 + 1)} - \omega^2 \right) W(\xi) - \alpha^2 \left( \frac{\beta^2 (n^2 - 1)(n^2 - 1 + \nu)}{6(n^2 + 1)} - \frac{\omega^2}{n^2(n^2 - 1)} \right) \frac{d^2 W(\xi)}{d\xi^2} + \alpha^4 \frac{(\beta^2 n^4 + 1)}{12n^2(n^2 + 1)} \frac{d^4 W(\xi)}{d\xi^4} = 0 \quad (5.2)$$

Уравнение (5.2) может быть представлено в факторизованной форме:

$$\left( \frac{d^2}{d\xi^2} + \mu^2 \right) \left( \frac{d^2}{d\xi^2} - \gamma^2 \right) [W] = 0$$

Принимая во внимание вид факторизованного оператора, общее решение можно представить в виде линейной комбинации гармонической и экспоненциальных составляющих

$$W(\xi) = C_1 \sin(\mu(\xi - \xi_0)) + C_2 \exp[-\gamma\xi] + C_3 \exp[\gamma(\xi - 1)], \quad (5.3)$$

где константы  $C_1 - C_3$  определяются граничными условиями. Далее был рассчитан спектр низкочастотных колебаний УНТ при различных граничных условиях. Рассмотрено влияние граничных условий, как на величины собственных значений, так и на форму колебаний при наименьшем «угловом волновом» числе  $n = 2$ . На рис. 7 представлены профили радиальных смещений для первых трех мод и соответствующие им профили УНТ в случае свободно опертых и закрепленных краев. Расчеты проводились для нехиральных УНТ с радиусом  $R = 0.39$  нм и характерными длинами  $L = 3.0, 6.0, 10.0$  нм. Для получения численных характеристик нормальных колебаний были использованы следующие параметры УНТ: модуль Юнга  $E = 5.5$  ТПа, коэффициент Пуассона  $\nu = 0.19$ , плотность  $\rho = 11700$  кг/м<sup>3</sup> и эффективная толщина стенки УНТ  $h = 0.067$  нм.

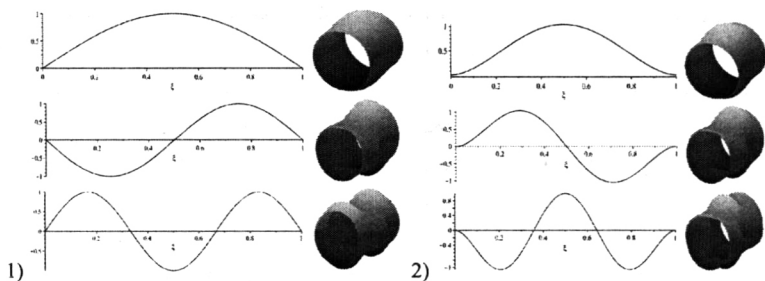


Рис. 7 – профили радиальных смещений первых трех мод и соответствующие им формы трубок в случае 1) шарнирно опертых краев, 2) закрепленных краев.

Для подтверждения гипотезы относительной малости деформации растяжения кольца и сдвиговой деформации значения частот были рассчитаны также из полных уравнений Сандерса-Коитера. Сравнение полученных спектров, приведенное на Рис. 8, показало, что редуцированная модель адекватно описывает низкочастотную часть спектра УНТ.

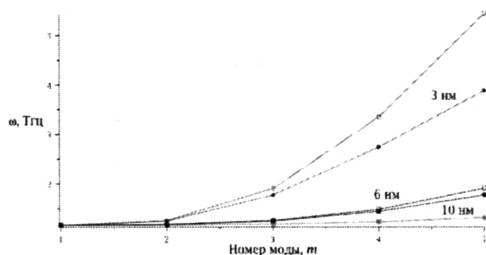


Рис. 8 – сравнение спектра шарнирно опертой трубки, полученного при решении полных уравнений Сандерса-Коитера (□) со спектром, полученным из уравнения (5.2) (■).

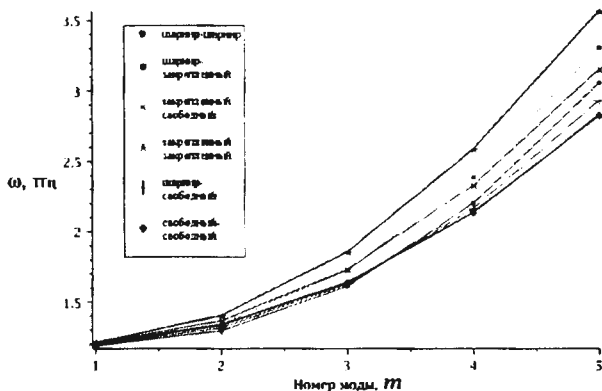


Рис. 9 – полученные спектры для нанотрубки длиной 6 нм и радиусом 0.39 нм.

На рис. 9 изображены полученные спектры для нанотрубки длиной 6 нм и радиусом 0.39 нм.

В главе 6 учтена геометрическая нелинейность в выражениях для деформаций и кривизн (5.1) и в рамках новой редуцированной теории типа Сандерса-Контера проведен анализ нелинейных колебаний УНТ. Особенности разработанной модели состоят в том, что, в отличие от полубезмоментной теории, учитывается энергия, обусловленная изменением всех компонент тензора кривизны-кручения. В отличие же от теории пологих оболочек учитываются все компоненты силы инерции и зависимость компонент тензора кривизны-кручения от всех составляющих вектора перемещений, но не учитывается энергия, связанная с изменением кольцевой и сдвиговой деформаций.

Результирующие усилия (продольное  $N_1$ , тангенциальное  $N_2$  и сдвиговое  $N_{12}$ , а также поперечная сила  $Q_1$ ) и моменты (продольный  $M_1$  и крутящий  $M_{12}$ ) определяются обобщенным законом Гука:

$$N_1 = \varepsilon_1 + \nu \varepsilon_2, \quad N_2 = \varepsilon_2 + \nu \varepsilon_1, \quad N_{12} = \frac{1-\nu}{2} \varepsilon_{12},$$

$$M_1 = \kappa_1 + \nu \kappa_2, \quad M_{12} = \frac{1-\nu}{2} \kappa_{12}, \quad Q_1 = \frac{\partial \kappa_1}{\partial \xi} + \nu \frac{\partial \kappa_2}{\partial \xi} + \frac{1-\nu}{2} \kappa_{12},$$

где  $\nu$  - коэффициент Пуассона. Выражение для потенциальной энергии оболочки может быть представлено в виде:

$$U = \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \left( \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + 2\nu \varepsilon_1 \varepsilon_2 + \frac{1-\nu}{2} \varepsilon_{12}^2 \right) d\xi d\theta + \\ + \frac{\beta^2}{24} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \left( \kappa_1^2 + \kappa_2^2 + 2\nu \kappa_1 \kappa_2 + \frac{1-\nu}{2} \kappa_{12}^2 \right) d\xi d\theta, \quad (6.1)$$

Кинетическая энергия колебаний в безразмерных переменных имеет вид:

$$T = \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^{2\pi} (\dot{u}^2 + \dot{v}^2 + \dot{w}^2) d\xi d\theta \quad (6.2)$$

В уравнениях (6.1 – 6.2) энергия измеряется в единицах  $ERLh$ , где  $E$  - модуль Юнга,  $R$  - радиус трубки,  $L$  - ее длина,  $h$  - толщина оболочки. Точка над символом означает дифференцирование по безразмерному времени  $\tau = t \sqrt{\frac{E}{\rho R^2(1-\nu^2)}}$ ,  $\rho$  - плотность графена.

В отличие от линейного предела, в нелинейном случае радиальное и тангенциальное модальное смещения с  $n$  узлами по кольцу дополняются безузловыми колебаниями (осесимметричная компонента):

$$u(t, \xi, \theta) = U(t, \xi) \cos n\theta + U_0(t, \xi) \\ v(t, \xi, \theta) = V(t, \xi) \sin n\theta, \\ w(t, \xi, \theta) = W(\xi) \cos n\theta + W_0(t, \xi).$$

Гипотеза относительной малости кольцевой деформации сжатия-растяжения и сдвиговой деформации позволяет выразить тангенциальное смещение, смещение вдоль образующей и возникающую в силу нелинейности осесимметричную компоненту через радиальное смещение:

$$V = -\frac{W}{n}, \quad U = -\frac{\alpha}{n^2} \frac{dW}{d\xi}, \quad W_0(t, \xi) = -\frac{(n^2-1)^2}{4n^2} W^2 - \frac{\alpha^2}{4n^2} \left( \frac{dW}{d\xi} \right)^2 \quad (6.3)$$

Подставляя полученные выражения в функцию Лагранжа и варьируя ее, получаем нелинейное дифференциальное уравнение, содержащее линейные члены четвертого порядка относительно радиального смещения:

$$\left( \frac{\beta^2 n^2 (n^2-1)^2}{12(n^2+1)} - \omega^2 \right) W(\xi) - \alpha^2 \left( \frac{\beta^2 (n^2-1)(n^2-1+\nu)}{6(n^2+1)} - \frac{\omega^2}{n^2(n^2-1)} \right) \frac{d^2 W(\xi)}{d\xi^2} + \\ + \alpha^4 \frac{(\beta^2 n^4 + 1)}{12n^2(n^2+1)} \frac{d^4 W(\xi)}{d\xi^4} + F(W) = 0, \quad (6.4)$$

где  $F = F_3(W)$  - многочлен третьей степени от радиального смещения  $W(t, \xi)$  и его производных по  $\xi$ .

В уравнение (6.4) подставляется функция  $W(t, \xi) = f_1(t) \sin(\pi\xi) + f_2(t) \sin(2\pi\xi)$ , описывающая профили радиального смещения вдоль трубки при условии возбуждения

лишь первых двух мод. Затем полученное выражение, в соответствии с процедурой метода Галеркина, проектируется на каждую из мод:

$$\begin{aligned} & \frac{d^3 f_1}{dt^3} + \omega_1^2 f_1 + K_3 f_1^3 + K_{012} f_2^2 f_1 + K_{101} f_2 f_1 \frac{d^2 f_2}{dt^2} + K_{002} f_1^2 \frac{d^2 f_1}{dt^2} + \\ & + K_{012} f_2^2 \frac{d^2 f_1}{dt^2} + K_{020} f_1 \left( \frac{df_1}{dt} \right)^2 + K_{011} f_2 \left( \frac{df_1}{dt} \right) \left( \frac{df_2}{dt} \right) + K_{120} f_1 \left( \frac{df_2}{dt} \right)^2 = 0 \\ & \frac{d^3 f_2}{dt^3} + \omega_2^2 f_2 + C_3 f_2^3 + C_{021} f_1^2 f_2 + C_{010} f_2 f_1 \frac{d^2 f_1}{dt^2} + C_{102} f_1^2 \frac{d^2 f_2}{dt^2} + \\ & + C_{112} f_2^2 \frac{d^2 f_2}{dt^2} + C_{021} f_2 \left( \frac{df_1}{dt} \right)^2 + C_{011} f_1 \left( \frac{df_1}{dt} \right) \left( \frac{df_2}{dt} \right) + C_{121} f_2 \left( \frac{df_2}{dt} \right)^2 = 0, \quad (6.5) \end{aligned}$$

где все  $K_j, C_j$  - известные константы,  $\omega_j, j=1,2$  - частота  $j$ -той нормальной моды.

После комплексификации уравнений (6.5), проведения процедуры многомасштабного разложения и ряда математических преобразований получены уравнения главного асимптотического приближения:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \chi_1}{\partial \tau_1} + A |\chi_1|^2 \chi_1 + B |\chi_2|^2 \chi_1 + C \chi_1^2 \chi_1^* &= 0 \\ i \frac{\partial \chi_2}{\partial \tau_1} + \omega_1 \chi_2 + A |\chi_2|^2 \chi_2 + B |\chi_1|^2 \chi_2 + C \chi_1^2 \chi_2^* &= 0 \end{aligned} \quad (6.6)$$

где  $A, B, C$  - известные действительные постоянные,  $\tau_1 = \varepsilon^2 t$  - медленное время,

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\omega_2}{\omega_1} - 1}. \text{ При переходе к эффективным частицам } \left( \psi_1 = \frac{\chi_1 + \chi_2}{\sqrt{2}}, \psi_2 = \frac{\chi_1 - \chi_2}{\sqrt{2}} \right)$$

система (6.6) трансформируется в уравнения следующего вида:

$$\begin{aligned} i \frac{d \psi_1}{d \tau_2} + \omega_1 (\psi_1 - \psi_2) + \frac{A+B+C}{2} |\psi_1|^2 \psi_1 + (A-C) |\psi_2|^2 \psi_1 + \frac{A-B+C}{2} \psi_1^2 \psi_1^* &= 0 \\ i \frac{d \psi_2}{d \tau_2} + \omega_1 (\psi_2 - \psi_1) + \frac{A+B+C}{2} |\psi_2|^2 \psi_2 + (A-C) |\psi_1|^2 \psi_2 + \frac{A-B+C}{2} \psi_2^2 \psi_2^* &= 0 \end{aligned} \quad (6.7)$$

Эта система обладает интегралом  $X = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ , что позволяет перейти к угловым переменным  $\psi_1 = X \cos \theta \exp[i\delta_1]$ ,  $\psi_2 = X \sin \theta \exp[i\delta_2]$ ,  $\Delta = \delta_1 - \delta_2$ :

$$\begin{aligned} \frac{d \theta}{d \tau_2} - \frac{\omega_1}{2} \sin \Delta + \frac{X(A-B+C)}{4} \sin 2\theta \sin 2\Delta &= 0 \\ \sin 2\theta \frac{d \Delta}{d \tau_2} - \omega_1 \cos \Delta \cos 2\theta - CX \sin 4\theta + \frac{X(A-B+C)}{2} \sin 4\theta \cos^2 \Delta &= 0 \end{aligned} \quad (6.8)$$

Фазовая плоскость и карты распределения энергии вдоль трубки, полученные из численного решения уравнений (6.8), представлены на рис. 10.



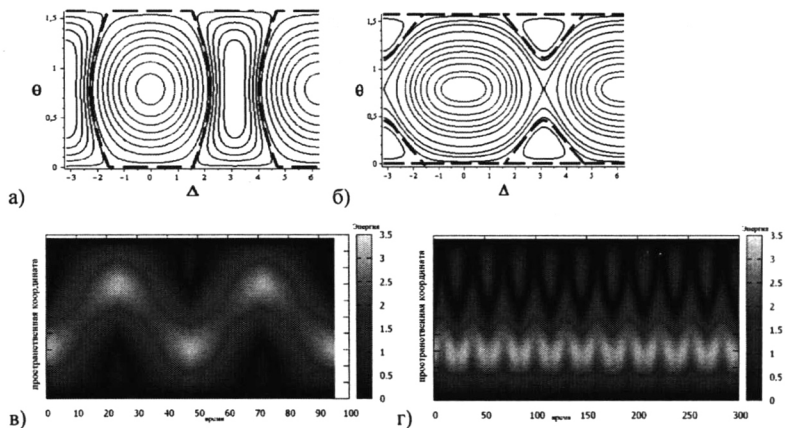


Рис. 10 – фазовые плоскости а), б) и карты полученного распределения энергии вдоль УНТ в), г) при различных уровнях возбуждения: более низкий уровень – биения между ЭЧ (фазовая плоскость (а) и карта распределения энергии со временем (в)), переход к локализации (фазовая плоскость (б) и карта распределения энергии во времени (г));

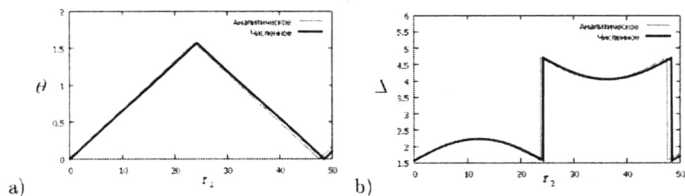


Рис. 11 – аналитическое решение уравнений (4.3) методом негладких преобразований (толстая линия – численное решение).

Получено также аналитическое решение уравнений (6.8) методом негладких преобразований. По рис. 11 видно, что это решение хорошо согласуется с численным решением уравнений (6.8).

## ВЫВОДЫ

1. Концепция *эффективных» частиц и предельных фазовых траекторий* с использованием аппарата негладких функций обеспечивает адекватное описание нестационарных процессов в динамических моделях различных уровней сложности: от нелинейного осциллятора в периодическом и случайном внешнем поле до УНТ, испытывающей импульсное возбуждение.
2. Полученное аналитическое представление спектральных характеристик УНТ впервые позволяет не только предсказать частоты ее нормальных колебаний при всех основных типах краевых условий, но и выявить особенности пространственного распределения энергии нормальных мод, обусловленные существованием пограничных слоев.
3. В УНТ может быть реализован процесс интенсивного энергообмена между частями намотки. Выявлены условия, при которых полный энергообмен становится невозможным и энергия остается пространственно локализованной в первоначально возбужденной области УНТ.
4. В случаях, когда доминируют геометрическая или физическая нелинейность, эффективные характеристики качественно отличаются, что приводит к закономерностям различного типа при описании интенсивного энергообмена.
5. Аналитические результаты, полученные в диссертации, подтверждены данными численного моделирования.

**Основные результаты работы изложены в следующих публикациях.**

1. L. Manevitch, A. Kovaleva, E. Manevitch, D. Shepelev. Limiting phase trajectories and nonstationary resonance oscillations of the Duffing oscillator. Part 1. A non-dissipative oscillator. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2011, vol. 16 (2), pp.1089–1097. ISSN: 1007-5704.
2. L. Manevitch, A. Kovaleva, E. Manevitch, D. Shepelev. Limiting phase trajectories and nonstationary resonance oscillations of the Duffing oscillator. Part 2. A dissipative oscillator. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2011, vol. 16 (2), pp. 1098–1105. ISSN: 1007-5704.
3. L. Manevitch, A. Kovaleva, D. Shepelev. Non-smooth approximations of the limiting phase trajectories for the Duffing oscillator near 1:1 resonance. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2011, vol. 240 (1), pp. 1-12. ISSN: 0167-2789.
4. V.V. Smirnov, D. S. Shepelev, L. I. Manevitch. Localization of bending vibrations in the single-wall carbon nanotubes. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2011, 2 (2), p. 102–106
5. V.V. Smirnov, D.S. Shepelev, and L.I. Manevitch. Energy exchange and transition to localization in the asymmetric Fermi-Pasta-Ulam oscillatory chain. *Eur. Phys. J. B* (2012) DOI: 10.1140/epjb/e2012-30753-2
6. L.I. Manevitch, D.S. Shepelev, A.S. Kovaleva. Non-stationary vibrations of a nonlinear oscillator under random excitation. In: *Proceedings of the 37th Summer School and Conference "Advanced Problems in Mechanics"*, (St Petersburg, June, 30 – July, 5, 2009). IPME, 2009. pp. 479-489. ISBN: 978-5-91339-029-5.
7. D. Shepelev, V.V. Smirnov, L.I. Manevitch. Energy exchange and transition to localization in asymmetric Fermi-Pasta-Ulam oscillatory chain. In: *Proceedings of the 38th Summer School and Conference "Advanced Problems in Mechanics"*, (St Petersburg, July, 1 - 5, 2010). IPME, 2010.
8. 7. V.V. Smirnov, D. Shepelev, L.I. Manevitch. Localization of bending vibrations in the single-wall carbon nanotubes In: *Proceedings of the 39th Summer School and Conference "Advanced Problems in Mechanics"*, (St Petersburg, July, 1 - 5, 2011). IPME, 2011.
9. D. Shepelev, V.V. Smirnov and L.I. Manevitch. Limiting Phase Trajectories and Energy Transfer in Asymmetric Fermi-Pasta- Ulam chain, *ENOC 2011*, 24-29 July 2011, Rome, Italy.







Объем: 1,0 усл. п. л.  
Подписано в печать: 25.12.2012  
Тираж: 100 экз. Заказ № 9566  
Отпечатано в типографии «Реглет»  
г. Москва, ул. Ленинский проспект, д. 2  
(495) 978-66-63; [www.reglet.ru](http://www.reglet.ru)

